

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ
Кафедра вычислительной математики

Б. В. Фалейчик

**ОДНОШАГОВЫЕ МЕТОДЫ
ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ
ЗАДАЧИ КОШИ**

Учебно-методическое пособие

Минск
2010

УДК 519.62
ББК 22.19
Ф19

Утверждено на заседании
кафедры вычислительной математики
15 апреля 2010 г., протокол № 11.

Фалейчик, Б. В.

Ф19 Одношаговые методы численного решения задачи Коши : учеб.-метод. пособие / Б. В. Фалейчик. — Минск : БГУ, 2010.— 42 с.

В данном пособии излагаются основы теории одношаговых методов численного интегрирования задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Основное внимание уделяется явным и неявным методам типа Рунге–Кутты, подробно рассматриваются детали программной реализации данных методов. Теоретический материал сопровождается упражнениями для самостоятельного выполнения. В приложении приводятся примерные условия лабораторных работ и набор тестовых задач для вычислительных экспериментов.

УДК 519.62
ББК 22.19

© Б. В. Фалейчик, 2010
© БГУ, 2010

Содержание

1	Одношаговые методы общего вида	4
1.1	Общее определение	4
1.2	Порядок метода	6
1.3	Выбор шага численного интегрирования	9
1.3.1	Равномерная сетка	9
1.3.2	Адаптивный выбор шага	10
2	Методы Рунге–Кутты	16
2.1	Общая форма методов	16
2.2	Условия порядка	18
2.3	Явные методы	19
2.3.1	Общий вид	19
2.3.2	Примеры явных методов Рунге–Кутты	20
2.4	Неявные методы	21
2.4.1	Диагонально-неявные методы	21
2.4.2	Неявные методы Рунге–Кутты общего вида	22
2.4.3	Реализация неявных методов Рунге–Кутты	23
3	Коллокационные методы	26
3.1	Общая схема построения	26
3.2	Порядок коллокационного метода	29
3.3	Классические коллокационные методы	30
3.3.1	Гауссовы методы	30
3.3.2	Методы Радо	30
3.3.3	Методы Лобатто	31
3.4	Особенности машинной реализации	31
	Приложение А. Лабораторные работы	33
A.1	Явные методы Рунге–Кутты	33
A.2	Введение в проблему жёсткости	34
A.3	Неявные методы	35
	Приложение Б. Тестовые задачи	36
B.1	Нежёсткие задачи	36
B.1.1	Маятник на свободной подвеске	36
B.1.2	Двойной маятник	36
B.1.3	Орбита Аренсторфа	37
B.1.4	Внешняя Солнечная система	37
B.1.5	Аттрактор Лоренца	39
B.1.6	Улучшенная модель «хищник–жертва»	39
B.2	Жёсткие задачи	40
B.2.1	Задача Протеро–Робинсона	40
B.2.2	Осциллятор Ван-дер-Поля	40
B.2.3	Реакция Робертсона	41
B.2.4	Реакция Белоусова–Жаботинского	41
	Литература	42

1 Одношаговые методы общего вида

1.1 Общее определение

Рассмотрим систему обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

$$y'(x) = f(x, y(x)), \quad (1.1a)$$

и начальное условие

$$y(x_0) = y_0, \quad x_0 \in \mathbb{R}, y_0 \in \mathbb{R}^n. \quad (1.1b)$$

Здесь $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ — искомая функция, $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Формулы (1.1) вместе определяют *задачу Коши* для системы ОДУ. Во многих случаях эти формулы удобно объединить в одну путём перехода к интегральному соотношению

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(z, y(z)) dz. \quad (1.2)$$

Пусть нам необходимо найти значение решения в некоторой точке $x_1 > x_0$. На практике редко удаётся вычислить $y(x_1)$ точно, поэтому приходится прибегать к приближённым (численным) методам.

Одношаговым методом численного интегрирования задачи (1.1) называется отображение

$$\Phi : \{x_0, y_0, x_1\} \mapsto y_1,$$

которое данному начальному условию (x_0, y_0) ставит в соответствие значение приближённого решения задачи (1.1) в данной точке $x_1 \in \mathbb{R}$:

$$\Phi(x_0, y_0, x_1) = y_1 \approx y(x_1).$$

Если отображение Φ является неявной функцией, то есть задано уравнением вида

$$\Psi(x_0, y_0, x_1, y_1) = 0,$$

то соответствующий одношаговый метод называется *неявным*. В противном случае, то есть если y_1 явно выражается через x_0 , y_0 и x_1 , метод называется *явным*.

ПРИМЕР 1.1. Рассмотрим скалярный случай $n = 1$. Начальное условие (1.1b) позволяет составить уравнение касательной к точному ре-

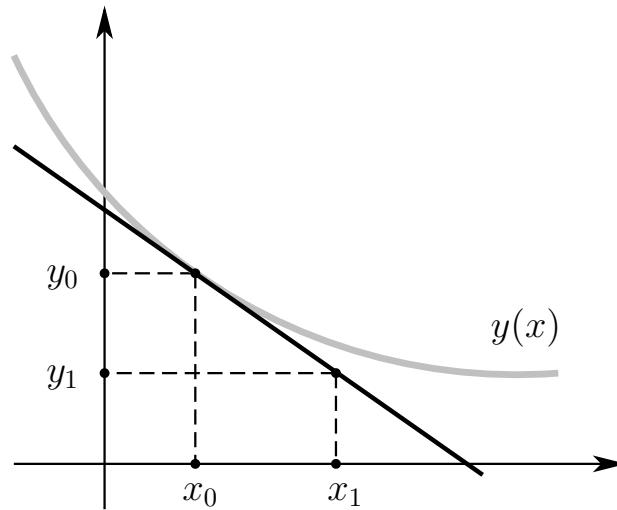


Рисунок 1. Геометрическая интерпретация явного метода Эйлера

шению y в точке x_0 : если (x_1, y_1) — точка на касательной, то справедливо соотношение

$$\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = y'(x_0) = f(x_0, y_0).$$

Полагая $y(x_1) \approx y_1$, получаем самый простой и самый известный одношаговый метод — *явный метод Эйлера*

$$y_1 = y_0 + (x_1 - x_0)f(x_0, y_0). \quad (1.3)$$

ПРИМЕР 1.2. Рассмотрим соотношение (1.2) для $x = x_1$:

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x_1} f(z, y(z))dz.$$

Приближим интеграл по правилу правых прямоугольников¹

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b - a)f(b)$$

и получим неявное соотношение для вычисления $y_1 \approx y(x_1)$:

$$y_1 = y_0 + (x_1 - x_0)f(x_1, y_1). \quad (1.4)$$

¹Заметим, что если применить формулу левых прямоугольников, получится явный метод Эйлера (1.3).

Это *неявный* метод Эйлера. Очевидно, что для вычисления y_1 необходимо решать нелинейное уравнение (систему из n нелинейных уравнений в общем случае).

▷_{1.1} Примените для аппроксимации интеграла (1.2) квадратурную формулу трапеций

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b))$$

и запишите формулу для соответствующего неявного метода.

Как правило, отображение Φ определено для всех x_1 , лежащих в некоторой окрестности x_0 , что позволяет рассматривать метод как функцию непрерывного аргумента $x = x_1$. Тем самым мы определяем функцию-приближение $\eta \approx y$.

Пусть дан одношаговый метод Φ и зафиксировано начальное условие (x_0, y_0) . *Функцией метода Φ* будем называть отображение $\eta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$, определённое по правилу

$$\eta(x) = \Phi(x_0, y_0, x).$$

1.2 Порядок метода

Классическим показателем точности методов численного интегрирования ОДУ является порядок метода. Это понятие связано с разложением точного и приближённого решений в ряд Тейлора.

Рассмотрим сначала y — точное решение уравнения (1.1) в скалярном случае и предположим, что оно достаточно гладкое. Введём следующие традиционные обозначения:

$$f = f(x_0, y_0), \quad f_x = \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0), \quad f_y = \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0), \quad (1.5)$$

$$\underbrace{f_{x \dots x}}_M \underbrace{y \dots y}_N = \frac{\partial^{M+N} f}{\partial x^M \partial y^N}(x_0, y_0). \quad (1.6)$$

Разложение Тейлора для $y(x_0 + h)$ в точке x_0 имеет вид

$$y(x) = y_0 + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2!}y''(x_0) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_0) + \dots \quad (1.7)$$

Тот факт, что y удовлетворяет (1.1), позволяет вычислить неизвестные

коэффициенты $y^{(k)}(x_0)$ для любого k . Действительно, мы имеем

$$y'(x_0) = f, \quad (1.8a)$$

$$y''(x_0) = \left. \frac{d}{dx} f(x, y(x)) \right|_{x=x_0} = f_x + f_y y'(x_0) = f_x + f_y f. \quad (1.8b)$$

$$y'''(x_0) = \left. \frac{d^2}{dx^2} f(x, y(x)) \right|_{x=x_0} = f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_y(f_x + f_y f), \quad (1.8c)$$

и так далее. Таким образом, мы имеем теоретическую возможность *точно* вычислить разложение Тейлора (1.7).

Теперь зафиксируем начальное условие (x_0, y_0) , рассмотрим произвольный одношаговый метод Φ и η — функцию этого метода. Традиционный способ оценки точности такого приближения заключается в сравнении разложений Тейлора для $\eta(x)$ с разложением (1.7). Чем больше членов в этих разложениях совпадают, тем выше порядок метода.

Одношаговый метод Φ с функцией метода η имеет порядок p , если для всех достаточно гладких задач (1.1)

$$y(x_0 + h) - \eta(x_0 + h) = Ch^{p+1} + O(h^{p+2}), \quad C \neq 0, \quad (1.9)$$

то есть разложения Тейлора в точке x_0 для точного и приближённого решений совпадают до члена h^p включительно:

$$y^{(k)}(x_0) = \eta^{(k)}(x_0) \quad \forall k = \overline{0, p}.$$

Разность $y(x) - \eta(x)$ называют *локальной погрешностью*, а слагаемое Ch^{p+1} — *главным членом локальной погрешности*.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.1. Следует понимать, что высокий порядок метода не всегда гарантирует высокую точность приближения.

ПРИМЕР 1.3. Вычислим порядок явного метода Эйлера. Согласно (1.3) имеем

$$\eta(x) = \Phi(x_0, y_0, x) = y_0 + (x - x_0)f(x_0, y_0).$$

Отсюда получаем

$$\begin{aligned} \eta(x_0) &= y_0, \\ \eta'(x_0) &= f(x_0, y_0) = y'(x_0), \\ \eta^{(k)}(x_0) &= 0 \neq y^{(k)}(x_0) \quad \forall k \geq 2. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$y(x_0 + h) - \eta(x_0 + h) = \frac{h^2}{2!} y''(x_0) + O(h^3).$$

Таким образом, порядок явного метода Эйлера равен единице, а константа погрешности, согласно (1.8b), равна

$$C = \frac{1}{2}(f_x + f_y f). \quad (1.10)$$

ПРИМЕР 1.4. Рассмотрим теперь неявный метод Эйлера (1.4). Для этого метода приближённое решение $\eta(x)$ определяется неявным соотношением

$$\eta(x) = y_0 + (x - x_0)f(x, \eta(x)).$$

Вычислим производные $\eta(x)$:

$$\begin{aligned} \eta'(x) &= f(x, \eta(x)) + (x - x_0) \frac{d}{dx} f(x, \eta(x)), \\ \eta''(x) &= 2 \frac{d}{dx} f(x, \eta(x)) + (x - x_0) \frac{d^2}{dx^2} f(x, \eta(x)). \end{aligned}$$

Отсюда с учётом того, что $\eta(x_0) = y_0$, получаем

$$\begin{aligned} \eta'(x_0) &= f(x_0, y_0) = y'(x_0), \\ \eta''(x_0) &= 2 \frac{d}{dx} f(x_0, y_0) = 2(f_x + f_y f) \neq y''(x_0). \end{aligned}$$

Следовательно, разложение локальной погрешности в ряд Тейлора имеет вид

$$y(x_0 + h) - \eta(x_0 + h) = -\frac{h^2}{2!} y''(x_0) + O(h^3).$$

Итак, неявный метод Эйлера имеет первый порядок, а его константа погрешности равна

$$C = -\frac{1}{2}(f_x + f_y f). \quad (1.11)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1.2. На рассмотренных примерах видно, что в общем случае константа погрешности C представляет собой вектор, который выражается через значения частных производных f в точке (x_0, y_0) .

▷_{1.2} Найдите порядок метода, построенного в упражнении 1.1, а также главный член его локальной погрешности.

1.3 Выбор шага численного интегрирования

Обычно исследователю необходимо получить приближённое решение задачи (1.1) на «большом» отрезке $[x_0, x_0 + H]$. Так как функция метода η даёт приемлемое приближение лишь в достаточно малой окрестности точки x_0 , традиционный подход к численному интегрированию ОДУ заключается в следующем. Отрезок интегрирования разбивается на N частей сеткой узлов

$$x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_N = x_0 + H \quad (1.12)$$

и строится набор приближённых значений $y_k \approx y(x_k)$ по правилу

$$y_{k+1} = \Phi(x_k, y_k, x_{k+1}), \quad k = \overline{0, N-1}. \quad (1.13)$$

Очевидно, что точность приближённого решения зависит от «частоты» сетки, а именно от величины

$$\tilde{h} = \min_{k=1, \dots, N} (x_k - x_{k-1}).$$

Как правило требуется найти приближённое решение с какой-то точностью. «Идеальный» критерий точности можно сформулировать, например так:

$$\sum_{k=1}^N |y_k - y(x_k)| < \varepsilon. \quad (1.14)$$

К сожалению, такая постановка задачи в общем случае оказывается слишком сложной, и на практике вычислитель требует лишь, чтобы на каждом шаге *главная часть локальной погрешности не превышала заданной величины*, которую обозначают² tol :

$$|C_k h_{k+1}^{p+1}| \leq tol, \quad \forall k = \overline{0, N-1}, \quad (1.15)$$

где $h_k = x_k - x_{k-1}$. Напомним, что согласно замечанию 1.2 на k -ом шаге константа погрешности C_k выражается через значения частных производных f в точке (x_k, y_k) .

1.3.1 Равномерная сетка

Самое простое разбиение вида (1.12) — равномерная сетка

$$\{x_k\} = \{x_0 + kh\}_{k=0}^N, \quad h = H/N. \quad (1.16)$$

²От английского tolerance (допустимое отклонение).

Такой выбор сетки имеет очевидные удобства при программной реализации и на практике им достаточно часто пользуются, если нужен быстрый результат. Однако, как мы скоро увидим, такой подход, во-первых, избыточен и, во-вторых, крайне неэффективен.

Предположим, что необходимо найти приближённое решение, удовлетворяющее (1.15) (будем рассматривать скалярный случай $n = 1$). Для этого, очевидно, необходимо располагать априорной информацией о величине

$$C_{\max} = \max_k |C_k|.$$

Получение такой информации в общем случае — достаточно серьёзная проблема. Если всё же C_{\max} нам известно, то из (1.15) следует, что шаг равномерной сетки (1.16) следует выбирать по формуле

$$h = \left(\frac{tol}{C_{\max}} \right)^{\frac{1}{p+1}}. \quad (1.17)$$

Понятно, что в случае, если главный член погрешности существенно изменяется на отрезке интегрирования, такая сетка, мягко говоря, не оптимальна: мы вынуждены делать очень маленькие шаги там, где, может быть, достаточно гораздо большего шага для достижения нужной точности.

1.3.2 Адаптивный выбор шага

Теперь читателю должно быть понятно, что разумный процесс пошагового интегрирования задачи Коши с ограничением на точность вида (1.15) должен использовать величину шага, зависящую от величины константы погрешности C_k . Чем больше константа, тем меньше должен быть шаг, и наоборот. Это означает, что нам необходим механизм оценки величины C_k на каждом шаге.

Существует два широко применяемых способа получения такой оценки. Первый — это так называемый метод двойного пересчёта, или *правило Рунге*.

Правило Рунге. Рассмотрим первый шаг процесса численного интегрирования методом Φ порядка p . Выберем какую-то величину начального шага h и сделаем сначала один «большой» шаг длины $2h$

$$\tilde{y}_2 = \Phi(x_0, y_0, x_0 + 2h),$$

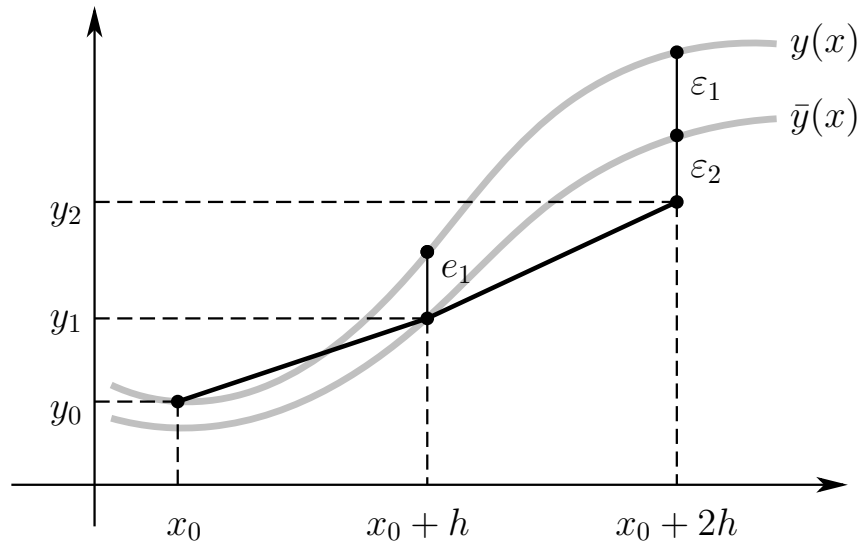


Рисунок 2. Распространение ошибки на двух шагах численного метода.

а также два шага длины h :

$$y_1 = \Phi(x_0, y_0, x_0 + h), \quad y_2 = \Phi(x_0 + h, y_1, x_0 + 2h).$$

Наша цель — сравнить погрешности приближений y_2 и \tilde{y}_2 . Согласно (1.9) имеем

$$y(x_0 + 2h) - \tilde{y}_2 = C_0(2h)^{p+1} + O(h^{p+2}). \quad (1.18)$$

Выражение погрешности для y_2 имеет более сложный вид (см. рис. 2). Оно состоит из двух частей:

$$e_2 = y(x_0 + 2h) - y_2 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2,$$

где $\varepsilon_1 = y(x_0 + 2h) - \bar{y}(x_0 + 2h)$, а ε_2 имеет вид

$$\varepsilon_2 = \bar{y}(x_0 + 2h) - y_2 = C_1 h^{p+1} + O(h^{p+2}). \quad (1.19)$$

Важно понимать, что $\bar{y}(x_0 + 2h) \neq y(x_0 + 2h)$, так как функция \bar{y} удовлетворяет уравнению (1.1а) с начальным условием $y(x_0 + h) = y_1$.

Можно показать, что для величины ε_1 справедлива оценка

$$\varepsilon_1 = (1 + O(h))e_1,$$

где e_1 — локальная ошибка первого шага

$$e_1 = y(x_0 + h) - y_1 = C_0 h^{p+1} + O(h^{p+2}),$$

а константа погрешности C_1 в (1.19) имеет вид

$$C_1 = C_0 + O(h).$$

Таким образом,

$$e_2 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \left(e_1 + O(h^{p+2}) \right) + \left((C_0 + O(h))h^{p+1} + O(h^{p+2}) \right),$$

откуда

$$e_2 = y(x_0 + 2h) - y_2 = 2C_0h^{p+1} + O(h^{p+2}). \quad (1.20)$$

Вычитая из (1.18) выражение (1.20), получаем

$$y_2 - \tilde{y}_2 = 2C_0(2^p - 1)h^{p+1} + O(h^{p+2}).$$

Это равенство позволяет вычислить оценку главной части погрешности для y_2 (см. (1.20)):

$$2C_0h^{p+1} + O(h^{p+2}) = \frac{y_2 - \tilde{y}_2}{2^p - 1} =: err, \quad (1.21)$$

а также приближённое значение константы погрешности

$$C_0 = \frac{err}{2h^{p+1}} + O(h). \quad (1.22)$$

Две последние формулы позволяют нам, во-первых, оценить погрешность e_2 , во-вторых, уточнить приближённое решение y_2 , и, в-третьих, выбрать оптимальный шаг интегрирования для дальнейших вычислений. Остановимся на каждом из этих пунктов подробнее.

Величина err , вычисляемая по формуле (1.21), по построению характеризует точность приближённого решения $y_2 \approx y(x_0 + 2h)$:

$$e_2 = err + O(h^{p+2}).$$

Если $|err| < tol$, то данное приближение приемлемо, в противном случае необходимо повторить вычисления с меньшим шагом (см. ниже).

Далее, согласно формуле (1.20), величина

$$\hat{y}_2 = y_2 + err \quad (1.23)$$

является приближением к $y(x_0 + 2h)$ порядка $p + 1$:

$$y(x_0 + 2h) - \hat{y}_2 = O(h^{p+2}).$$

Таким образом, мы фактически получили способ повышения порядка метода на единицу. Величину \hat{y}_2 иногда называют *экстраполированным* приближением.

▷1.3 Пользуясь формулами (1.23), (1.21) постройте общую формулу, по которой из любого одношагового метода Φ порядка p можно получить метод $\hat{\Phi}$ порядка $p + 1$.

▷1.4 Запишите методы, полученные таким образом из явного и неявного методов Эйлера.

После того, как вычислена оценка погрешности err , возможны два варианта развития событий в зависимости от выполнения неравенства

$$|err| < tol \quad (1.24)$$

Предположим, что неравенство не выполняется, то есть приближённое решение y_2 не является достаточно точным. Стандартный способ повышения точности в этом случае таков: y_2 «отбрасывается» и вычисления повторяются с меньшим шагом h_{new} . Выбор величины h_{new} упрощается тем, что нам известна оценка константы погрешности (1.22). Согласно (1.20) мы должны выбрать h_{new} из условия

$$|2C_0 h_{new}^{p+1}| < tol,$$

откуда сразу же получаем

$$h_{new} < \delta h, \quad (1.25)$$

где

$$\delta = \left(\frac{tol}{|err|} \right)^{\frac{1}{p+1}}. \quad (1.26)$$

Если же неравенство (1.24) выполняется, мы принимаем приближение y_2 (или его уточнённое значение \hat{y}_2) и продолжаем процесс численного интегрирования из точки $x_0 + 2h$ с новым значением шага h_{new} . Выбирают этот шаг из следующих соображений. Предположим, что константа погрешности на следующем шаге \tilde{C}_0 будет незначительно отличаться от C_0 (это будет верно, если шаг достаточно мал, а функция f достаточно гладкая). Тогда для того, чтобы на новом шаге выполнялась оценка (1.24), мы совершенно аналогично предыдущему случаю должны выбрать h_{new} из условий (1.25), (1.26). Только теперь величина δ будет больше единицы, то есть шаг численного интегрирования увеличится.

Таким образом, алгоритм автоматического (адаптивного) выбора шага численного интегрирования имеет следующий общий вид.

1. $x \leftarrow x_0, y \leftarrow y_0, h \leftarrow h_0, X \leftarrow x_0 + H.$

2. Если $x = X$, то завершаем алгоритм.
3. Вычисляем $y_2 \leftarrow \Phi(x + h, \Phi(x, y, x + h), x + 2h)$,
 $\tilde{y}_2 \leftarrow \Phi(x, y, x + 2h)$.
4. Находим оценку погрешности err (1.21) и коэффициент δ (1.26).
5. Вычисляем $h_{new} \leftarrow \alpha\delta h$, где $\alpha < 1$ — «страховочный множитель». Как правило α выбирают в пределах от 0.7 до 0.9.
6. Если $\delta < 1$, то полагаем $h \leftarrow h_{new}$ и возвращаемся к пункту 3.
7. Если же $\delta \geq 1$, то принимаем шаг: запоминаем пару значений $(x + 2h, y_2)$. Вместо y_2 здесь можно взять \hat{y}_2 .
8. Полагаем $x \leftarrow x + 2h$, $y \leftarrow y_2(\hat{y}_2)$, $h \leftarrow \min\{h_{new}, \frac{X-x}{2}\}$.
9. Возвращаемся к пункту 2.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.3. В случае системы ОДУ оценка погрешности err , очевидно, будет векторной величиной. Поэтому в формулах вида (1.26) следует использовать какую-либо векторную норму. Кроме этого, для некоторых задач величина относительной погрешности может быть более информативной, поэтому используют также формулы типа

$$err = \frac{1}{2^p - 1} \|D^{-1}(y_2 - \tilde{y}_2)\|,$$

где $D = \text{diag}(\hat{y}_2)$. Если используется абсолютная погрешность, то $D = I$ — единичная матрица.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.4. Общепринято накладывать ограничения на величину шага h : он не должен быть слишком мал. Если же такой случай возникает, программы численного интегрирования обычно выдают сообщение об ошибке и прекращают работу. Кроме этого, накладываются ограничения на скорость увеличения шага, то есть на величину δ (см. также [1, стр. 177]):

$$\delta = \min \left(\delta_{\max}, \left(\frac{tol}{|err|} \right)^{\frac{1}{p+1}} \right).$$

Оценка погрешности с помощью вложенных методов. Данный способ оценки главной части погрешности более прост, но менее универсален, чем правило Рунге. Он требует наличия двух методов: метода Φ порядка p и метода $\hat{\Phi}$ порядка $q > p$. Обозначим

$$y_1 = \Phi(x_0, y_0, x_0 + h), \quad \hat{y}_1 = \hat{\Phi}(x_0, y_0, x_0 + h).$$

По определению имеем

$$\begin{aligned}y(x_0 + h) - y_1 &= Ch^{p+1} + O(h^{p+2}), \\y(x_0 + h) - \hat{y}_1 &= \hat{C}h^{q+1} + O(h^{q+2}).\end{aligned}$$

Отсюда с учётом того, что $q > p$, получаем

$$\hat{y}_1 - y_1 = Ch^{p+1} + O(h^{p+2}).$$

Таким образом, величина

$$err = \hat{y}_1 - y_1 \tag{1.27}$$

с точностью до $O(h^{p+2})$ равна главной части локальной погрешности $y(x_0 + h) - y_1$. Дальнейшие рассуждения полностью аналогичны правилу Рунге. В частности, правило выбора оптимального шага (1.25), (1.26), а также общая схема алгоритма адаптивного выбора шага остаётся без изменений. Единственное отличие заключается в способе оценки погрешности: вместо (1.21) имеем (1.27).

2 Методы Рунге–Кутты

Методы типа Рунге–Кутты являются наиболее популярными одношаговыми методами численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) в настоящее время. Название этих методов связано с именами немецких математиков Карла Рунге (1856–1927) и Мартина Кутты (1867–1944). Рунге был первым, кто построил частные методы данного типа, а Кутта впоследствии дал общую форму (явного) метода практически в том же виде, который мы имеем сейчас.

2.1 Общая форма методов

Рассмотрим задачу приближённого вычисления решения задачи (1.1) в точке $x_0 + h$, где h — некоторое положительное число, в дальнейшем называемое величиной шага. Общая схема метода типа Рунге–Кутты (РК) для вычисления $y_1 \approx y(x_0 + h)$ выглядит следующим образом.

Зафиксируем некоторое $s \in \mathbb{N}$ — число этапов (стадий) метода, и зададим матрицу $A = (a_{ij})_{i,j=1}^s$, векторы b и c размерности s , которые удобно разместить в таблицу следующего вида:

$$\frac{c}{b^T} \Big| \begin{array}{c} A \\ \\ \\ \end{array} = \frac{\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \cdots & a_{ss} \\ \hline b_1 & \cdots & b_s \end{array}}{\begin{array}{ccc} & & \end{array}}. \quad (2.1)$$

Матрицу A иногда называют матрицей Бутчера³, а всю таблицу (2.1) — таблицей Бутчера. Для вычисления y_1 необходимо сначала найти s вспомогательных величин $\{\kappa_i\}_{i=1}^s$ по формулам

$$\kappa_i = f\left(x_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \kappa_j\right), \quad j = \overline{1, s}, \quad (2.2a)$$

после чего искомое значение вычисляется как

$$y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i \kappa_i. \quad (2.2b)$$

³Джон Бутчер (университет Окленда) — новозеландский математик, внесший большой вклад в развитие и популяризацию методов РК.

Помимо записи (2.2) метод РК можно представить в эквивалентной форме, которую иногда называют *симметричной*. Обозначая

$$Y_i = y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \kappa_j, \quad (2.3)$$

из (2.2) получаем

$$Y_i = y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(x_0 + c_j h, Y_j), \quad i = \overline{1, s}, \quad (2.4a)$$

$$y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i f(x_0 + c_i h, Y_i). \quad (2.4b)$$

В дальнейшем нам пригодится ещё одно полезное соотношение между величинами κ_i и Y_i . В общем случае системы из n обыкновенных дифференциальных уравнений рассматриваемые величины будут векторами из \mathbb{R}^n . Пусть V_0 — матрица, составленная из s векторов-столбцов y_0 , V — матрица размерности $n \times s$, составленная из векторов-столбцов Y_i , а K — аналогичная матрица для κ_i . Тогда тождество (2.3) для всех $i = \overline{1, s}$ может быть записано как

$$\underbrace{\begin{bmatrix} Y_{11} & \cdots & Y_{s1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ Y_{1n} & \cdots & Y_{sn} \end{bmatrix}}_V = \underbrace{\begin{bmatrix} y_{01} & \cdots & y_{01} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{0n} & \cdots & y_{0n} \end{bmatrix}}_{V_0} + h \underbrace{\begin{bmatrix} \kappa_{11} & \cdots & \kappa_{s1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa_{1n} & \cdots & \kappa_{sn} \end{bmatrix}}_K \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{s1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1s} & \cdots & a_{ss} \end{bmatrix}}_{A^T}.$$

Отсюда получаем (естественно, только в случае обратимости матрицы A)

$$K = \frac{1}{h}(V - V_0)(A^T)^{-1}. \quad (2.5)$$

Далее, сопоставляя (2.2a) и (2.3) имеем

$$\kappa_i = f(x_0 + c_i h, Y_i),$$

следовательно, формула (2.4b) может быть представлена в виде

$$y_1 = y_0 + hKb.$$

Подставляя сюда соотношение (2.5), получаем альтернативное правило вычисления y_1 :

$$y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^s d_i (Y_i - y_0), \quad (2.6)$$

где

$$(d_1, \dots, d_s)^T = (A^T)^{-1}b.$$

Если при вычислениях используется симметричная форма неявного метода РК, формула (2.6) часто является более предпочтительной, чем (2.4b): во-первых, она экономит вычисления функции f и, во-вторых, вычислительно более устойчива в случаях, когда f имеет большую константу Липшица.

2.2 Условия порядка

Неизвестные коэффициенты методов типа Рунге–Кутты (2.1) традиционно выбираются таким образом, чтобы получившийся метод имел как можно более высокий порядок точности.

ПРИМЕР 2.1. Найдём условия, которым должен удовлетворять произвольный метод РК второго порядка. Запишем приближённое решение y_1 в симметричной форме (2.4b) и будем рассматривать его как функцию переменной h . Функция метода, очевидно, имеет вид $\eta(x_0 + h) = y_1$. Так как

$$\eta^{(k)}(x_0) = y_1^{(k)} \Big|_{h=0},$$

для того, чтобы метод имел порядок 2, по определению (см. пункт 1.2) необходимо, чтобы выполнялись условия

$$y_1|_{h=0} = y_0, \quad (2.7a)$$

$$y_1'|_{h=0} = y'(x_0) = f, \quad (2.7b)$$

$$y_1''|_{h=0} = y''(x_0) = f_x + f_y f. \quad (2.7c)$$

Условие (2.7a), очевидно, выполняется всегда. Используя стандартное соотношение $\kappa_i = f(x_0 + c_i h, Y_i)$ и дифференцируя (2.4b) имеем

$$y_1' = \sum_i b_i \kappa_i + h \sum_i b_i \kappa_i', \quad (2.8)$$

$$y_1'' = 2 \sum_i b_i \kappa_i' + h \sum_i b_i \kappa_i''.$$

Во всех суммах здесь и далее суммирование идёт от 1 до s . Вычислим

$$\begin{aligned} \kappa_i' &= \frac{d}{dh} f(x_0 + c_i h, Y_i) = c_i f_x'() + f_y'() Y_i' = [\text{используем (2.3)}] = \\ &= c_i f_x'() + f_y'() \left(\sum_j a_{ij} \kappa_j + h \sum_j a_{ij} \kappa_j' \right). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Здесь $f'_x() = \frac{\partial}{\partial x} f(x_0 + c_i h, Y_i)$, $f'_y() = \frac{\partial}{\partial y} f(x_0 + c_i h, Y_i)$. Используя (2.9) из (2.8) получаем

$$\begin{aligned} y'_1|_{h=0} &= \sum_i b_i \kappa_i|_{h=0} = f \sum_i b_i, \\ y''_1|_{h=0} &= 2 \sum_i b_i \kappa'_i|_{h=0} = 2 \sum_i b_i \left[c_i f_x + f_y f \sum_j a_{ij} \right]. \end{aligned}$$

Сопоставляя эти формулы с (2.7b), (2.7c), получаем следующие условия второго порядка для методов РК:

$$\begin{aligned} \sum_i b_i &= 1, \\ \sum_i b_i c_i &= \frac{1}{2}, \\ \sum_i b_i \sum_j a_{ij} &= \frac{1}{2}. \end{aligned} \tag{2.10}$$

▷_{2.1} Выведите условия третьего порядка.

ЗАМЕЧАНИЕ 2.1. В подавляющем большинстве случаев при построении методов РК априори полагают $c_i = \sum_j a_{ij}$, так что последние два условия в (2.10) эквивалентны.

ЗАМЕЧАНИЕ 2.2. В примере 2.1 мы рассматривали случай скалярного ОДУ. Следует, однако, понимать, что в общем случае условия порядка для систем ОДУ будут отличными от скалярного случая.

В общем случае прямое нахождение условий порядка по предложенной схеме является крайне трудоёмкой процедурой. Для того, чтобы облегчить эту задачу, был разработан специальный аппарат, основанный на так называемых помеченных деревьях (см. [1, II.2]).

2.3 ЯВНЫЕ МЕТОДЫ

2.3.1 Общий вид

Именно явные методы Рунге–Кутты можно назвать классическими, так как именно такого рода формулы строили в своё время Рунге и Кутта.

Пусть в таблице (2.1) $c_0 = 0$ и $a_{ij} = 0$ при всех $i \leq j$. Тогда метод вычисления $y_1 \approx y(x_0 + h)$, определяемый формулами (2.2), (2.4), называется *явным s -стадийным методом Рунге–Кутты*.

Общая схема вычисления $\{\kappa_i\}$ по формуле (2.2а) для явных методов РК имеет простой вид:

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= f(x_0, y_0) \\ \kappa_2 &= f(x_0 + c_2h, y_0 + ha_{21}\kappa_1), \\ \kappa_3 &= f(x_0 + c_3h, y_0 + h(a_{31}\kappa_1 + a_{32}\kappa_2)), \\ &\dots\dots\dots \\ \kappa_s &= f(x_0 + c_sh, y_0 + h(a_{s1}\kappa_1 + \dots + a_{s,s-1}\kappa_{s-1})). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Явные методы являются наиболее простыми в реализации методами типа РК: вспомогательные значения κ_i вычисляются последовательно, каждое последующее из них явно выражается через уже найденные. Такой процесс, очевидно, невозможен, если в верхнем треугольнике матрицы A (включая диагональ) есть ненулевые элементы.

2.3.2 Примеры явных методов Рунге–Кутты

Используя условия (2.10) легко получить общий вид явных двустадийных методов второго порядка. Так как $c_1 = a_{11} = a_{12} = a_{22} = 0$, на оставшиеся коэффициенты метода имеем условия

$$\begin{aligned} b_1 + b_2 &= 1, \\ b_2c_2 &= b_2a_{21} = \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

откуда получаем следующий общий вид таблицы Бутчера:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2}b_2^{-1} & \frac{1}{2}b_2^{-1} & \\ \hline & 1 - b_2 & b_2 \end{array} \quad (2.12)$$

Здесь b_2 — параметр, как правило лежащий в полуинтервале $(0, 1]$.

Приведём без вывода метод порядка 3

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & \\ \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & \\ \hline & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4} \end{array} \quad (2.13)$$

а также наиболее популярный «классический» метод четвёртого порядка

$$\begin{array}{c|cccc}
 0 & & & & \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\
 \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
 \hline
 & \frac{1}{6} & \frac{2}{6} & \frac{2}{6} & \frac{1}{6}
 \end{array} \quad (2.14)$$

В заключение раздела приведём один из наиболее успешных вложенных методов Рунге–Кутты (см. стр. 14) — метод Дормана–Принса порядка 5(4).

$$\begin{array}{c|cccccc}
 0 & & & & & \\
 \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & & & & \\
 \frac{3}{10} & \frac{3}{40} & \frac{9}{40} & & & \\
 \frac{4}{5} & \frac{44}{45} & -\frac{56}{15} & \frac{32}{9} & & \\
 \frac{8}{9} & \frac{19372}{6561} & -\frac{25360}{2187} & \frac{64448}{6561} & -\frac{212}{729} & \\
 1 & \frac{9017}{3168} & -\frac{355}{33} & \frac{46732}{5247} & \frac{49}{176} & -\frac{5103}{18656} \\
 1 & \frac{35}{384} & 0 & \frac{500}{1113} & \frac{125}{192} & -\frac{2187}{6784} & \frac{11}{84} \\
 \hline
 y_1 & \frac{35}{384} & 0 & \frac{500}{1113} & \frac{125}{192} & -\frac{2187}{6784} & \frac{11}{84} & 0 \\
 \hat{y}_1 & \frac{5179}{57600} & 0 & \frac{7571}{16695} & \frac{393}{640} & -\frac{92097}{339200} & \frac{187}{2100} & \frac{1}{40}
 \end{array} \quad (2.15)$$

Удобство таких методов состоит в том, что для получения оценки погрешности требуется минимальное количество дополнительных вычислений: первая строчка коэффициентов b_i в этой таблице определяет приближение y_1 порядка 5, а вторая — \hat{y}_1 порядка 4 для оценки погрешности.

2.4 Неявные методы

2.4.1 Диагонально-неявные методы

Данные методы более сложны в реализации, чем явные, но проще, чем неявные методы РК общего вида.

Методы Рунге–Кутты с матрицей A такой, что $a_{ij} = 0$ при всех $i < j$, называются *диагонально-неявными*.

Причина, по которой такие методы выделяют в отдельный класс, заключается в относительной простоте вычислений на стадиях (2.2а):

$$\kappa_i = f(x_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^{s-1} a_{ij} \kappa_j + h a_{ii} \kappa_i). \quad (2.16)$$

Таким образом, на i -й стадии мы имеем нелинейное уравнение для нахождения κ_i (в случае $n = 1$) или систему из n нелинейных уравнений в общем случае.

▷2.2 Запишите вид системы (2.16) в общем случае, а также схему метода Ньютона для её решения. Объясните, за счёт чего можно добиться экономии вычислений в случае, когда все a_{ii} равны между собой⁴.

2.4.2 Неявные методы Рунге–Кутты общего вида

В общем случае метод типа (2.2), (2.4) является неявным. Для его реализации, то есть для нахождения значений $\{\kappa_i\}$ (или, что равносильно, $\{Y_i\}$) необходимо решить систему нелинейных уравнений (2.2а) или (2.4а). Для того, чтобы прочувствовать структуру этой системы, мы рекомендуем начать с выполнения следующего упражнения.

▷2.3 Выпишите явный вид уравнений (2.2а) и (2.4а) для случая $s = n = 2$.

Пусть A и B — две квадратные матрицы размерностей s и n соответственно. *Прямым (кронекеровским) произведением* $A \otimes B$ называется блочная матрица

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1s}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2s}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{s1}B & a_{s2}B & \cdots & a_{ss}B \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Рассмотрим симметричную форму записи метода РК (2.4). Составим из неизвестных векторов Y_i один большой вектор размерности ns :

$$Y = (Y_1, \dots, Y_s)^T.$$

⁴Такие методы называются однократно-неявными.

Аналогичным образом определим вектор-функцию $F : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{ns} \rightarrow \mathbb{R}^{ns}$ по правилу

$$F(x, Y) = \begin{pmatrix} f(x + c_1 h, Y_1) \\ f(x + c_2 h, Y_2) \\ \vdots \\ f(x + c_s h, Y_s) \end{pmatrix}.$$

Теперь уравнения (2.4а) могут быть записаны в компактной векторной форме

$$Y = e \otimes y_0 + h(A \otimes I)F(x_0, Y). \quad (2.18)$$

Здесь I — единичная матрица размерности n , $e = \underbrace{(1, \dots, 1)}_s^T$.

▷_{2.4} Запишите аналогичным образом систему уравнений (2.2а).

2.4.3 Реализация неявных методов Рунге–Кутты

Обсудим проблему эффективного решения системы уравнений (2.18). Прежде всего для минимизации ошибок округления⁵ вместо Y_i рассмотрим

$$z_i = Y_i - y_0 \quad \text{и соответственно} \quad Z = Y - e \otimes y_0.$$

Тогда уравнения (2.4а), (2.18) примут вид

$$z_i = h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(x_0 + c_j h, y_0 + z_j), \quad i = \overline{1, s},$$

$$Z = h(A \otimes I)F(x_0, e \otimes y_0 + Z). \quad (2.19)$$

Традиционно при реализации неявных методов Рунге–Кутты используют метод Ньютона, для применения которого систему (2.19) нужно сначала представить в виде

$$\mathbf{F}(Z) = 0,$$

где

$$\mathbf{F}(Z) = Z - h(A \otimes I)F(x_0, e \otimes y_0 + Z). \quad (2.20)$$

Теперь метод Ньютона можно записать в общей форме

$$Z^{l+1} = Z^l + \Delta Z^l, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.21a)$$

⁵Напомним, что в машинной арифметике абсолютная погрешность округления возрастает с ростом модуля числа. Поэтому на практике вычислители стараются работать с меньшими по модулю величинами.

где на каждой итерации метода ΔZ^l вычисляется путём решения системы линейных уравнений

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial Z}(Z^l) \Delta Z^l = -\mathbf{F}(Z^l). \quad (2.21b)$$

Важный момент теперь состоит в том, чтобы по определению (2.20) выразить матрицу Якоби $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial Z}$ через $\frac{\partial f}{\partial y}$:

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial Z}(Z) = I - h \begin{pmatrix} a_{11} \frac{\partial f}{\partial y}(x_0 + c_1 h, y_0 + z_1) & \cdots & a_{1s} \frac{\partial f}{\partial y}(x_0 + c_s h, y_0 + z_s) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{s1} \frac{\partial f}{\partial y}(x_0 + c_1 h, y_0 + z_1) & \cdots & a_{ss} \frac{\partial f}{\partial y}(x_0 + c_s h, y_0 + z_s) \end{pmatrix}.$$

▷_{2.5} Выведите эту формулу.

Таким образом, прямая реализация итерационного процесса (2.21) является весьма трудоёмкой: на каждой итерации приходится s раз вычислять матрицу Якоби $\frac{\partial f}{\partial y}$, а также решать СЛАУ (2.21b), что требует $O(N^3)$ операций, где $N = ns$. Значительно снизить вычислительные затраты позволяет использование «замороженной» матрицы Якоби:

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x_0 + c_i h, y_0 + z_i) \approx J = \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0),$$

откуда получаем

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial Z}(Z^l) \approx I - hA \otimes J.$$

Это приводит к тому, что вместо (2.21b) на каждой итерации метода Ньютона нужно решать СЛАУ с постоянной матрицей:

$$(I - hA \otimes J) \Delta Z^l = -\mathbf{F}(Z^l). \quad (2.22)$$

Для решения этих систем естественно применить метод LU -разложения. Однократное построение разложения $I - hA \otimes J = LU$ требует $O(N^3)$ операций (столько же, сколько и метод Гаусса), зато сложность последующего решения систем вида (2.22) составляет $O(N^2)$. Описанный подход называют упрощёнными ньютоновскими итерациями.

После того, как итерационный процесс Ньютона сошёлся с требуемой точностью, давая приближение $Z^m = (z_1^m, \dots, z_s^m)^T \approx Z$, искомое приближение y_1 вычисляется по формуле (2.6), которая в нашем случае, очевидно, принимает вид

$$y_1 = y_0 + \sum_{i=1}^s d_i z_i^m.$$

Что касается выбора начального приближения Z^0 , то самый простой вариант — это $Z^0 = 0$. Однако если метод Рунге–Кутты является коллокационным, то возможен более рациональный подход (см. пункт 3.4).

3 Коллокационные методы

3.1 Общая схема построения

Рассмотрим начальную задачу (1.1). Для простоты будем рассматривать пока лишь случай одного скалярного уравнения. Пусть необходимо найти приближённое решение этой задачи на отрезке $[x_0, x_0 + h]$.

Метод коллокации является достаточно общим и может, в принципе, применяться к решению произвольных операторных уравнений. Суть метода такова: приближённое решение ищется в виде разложения по некоторому базису функций и выбирается таким образом, чтобы при его подстановке исходное уравнение обращалось в тождество в заранее заданных точках $\{\xi_i\}$.

Рассмотрим s различных точек $\{\xi_i\}_{i=1}^s$:

$$x_0 \leq \xi_1 < \xi_2 < \dots < \xi_s \leq x_0 + h.$$

Коллокационным многочленом называется многочлен u степени s , удовлетворяющий начальному условию $u(x_0) = y_0$ и дифференциальному уравнению (1.1) в каждой точке ξ_i :

$$u'(\xi_i) = f(\xi_i, u(\xi_i)), \quad i = \overline{1, s}. \quad (3.1)$$

Точки $\{\xi_i\}$ будем называть *узлами коллокации*.

▷3.1 Положите $u(x) = \sum_{i=0}^s \alpha_i x^{i-1}$ и запишите общий вид системы уравнений, которую необходимо решить для нахождения неизвестных коэффициентов α_i коллокационного многочлена. В чём состоит сложность решения этой системы? Каким образом можно решать эту систему в общем случае?

Упростить вычисление коллокационного многочлена можно следующим образом. Рассмотрим его производную u' , которая, очевидно, является многочленом степени не выше $s - 1$. Пусть $u'(\xi_i) = \kappa_i$. Тогда u' может быть представлена в виде

$$u'(x) = \sum_{i=1}^s \kappa_i \varphi_i(x), \quad (3.2)$$

где φ_i — базисный многочлен Лагранжа для узлов коллокации,

$$\varphi_i(x) = \prod_{j \neq i}^s \frac{x - \xi_j}{\xi_i - \xi_j}, \quad (3.3)$$

обладающий свойством $\varphi_i(\xi_j) = \delta_{ij}$. Следовательно,

$$u(x) = y_0 + \sum_{i=1}^s \kappa_i \int_{x_0}^x \varphi_i(z) dz. \quad (3.4)$$

Подставляя это выражение в условия коллокации (3.1), получаем систему уравнений для нахождения неизвестных κ_i :

$$\kappa_i = f \left(\xi_i, y_0 + \sum_{j=1}^s \kappa_j \int_{x_0}^{\xi_i} \varphi_j(z) dz \right). \quad (3.5)$$

Покажем, что построенный метод является представителем семейства методов Рунге–Кутты. Сделаем замену переменных: $x = x_0 + th$. Тогда имеем $\xi_i = x_0 + c_i h$, $0 \leq c_i \leq 1$, и

$$\varphi_i(x_0 + th) = \prod_{j \neq i} \frac{t - c_j}{c_i - c_j} = \tilde{\varphi}_i(t). \quad (\widetilde{3.3})$$

Обозначим

$$\psi_i(t) = \int_0^t \tilde{\varphi}_i(\tau) d\tau. \quad (3.6)$$

Подставляя $(\widetilde{3.3})$ в (3.5), получаем

$$\kappa_i = f \left(x_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \kappa_j \right), \quad i = \overline{1, s}, \quad (3.7)$$

где

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} \tilde{\varphi}_j(z) dz = \psi_j(c_i). \quad (3.8)$$

Для приближённого решения $y_1 = u(x_0 + h) \approx y(x_0 + h)$ из (3.4) имеем

$$y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i \kappa_i, \quad (3.9)$$

$$b_i = \int_0^1 \tilde{\varphi}_i(z) dz = \psi_i(1). \quad (3.10)$$

Как видим, (3.7), (3.9) являются классическими формулами метода Рунге–Кутты. Коэффициенты матрицы Бутчера для коллокационных методов зависят лишь от точек $\{c_i\}$ и вычисляются по формулам (3.8), (3.10), (3.6).

ЗАМЕЧАНИЕ 3.1. Преимущество коллокационных методов по сравнению с большинством других методов РК, заключается в том, что они дают непрерывное приближение к решению на всём отрезке $[x_0, x_0 + h]$ — коллокационный многочлен (3.4), который также можно выразить через полиномы ψ_i (3.6) в виде

$$u(x_0 + th) = y_0 + h \sum_{i=1}^s \kappa_i \psi_i(t). \quad (3.11)$$

Также по построению из (3.8), (2.3) получаем

$$u(x_0 + c_i h) = y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \kappa_j = Y_i.$$

▷3.2 Есть ли какая-нибудь связь между функцией коллокационного метода $\eta(x) = \Phi(x_0, y_0, x)$ (см. определение на странице 6) и самим коллокационным многочленом?

ЗАМЕЧАНИЕ 3.2. Нетрудно заметить, что коллокационные методы могут быть легко применены и в случае системы из n обыкновенных дифференциальных уравнений. В этом случае имеем $\kappa_i \in \mathbb{R}^n$, а коллокационный многочлен u — вектор-функция с полиномиальными компонентами.

ПРИМЕР 3.1. Найдём общий вид одностадийных коллокационных методов, положив $c_1 = \theta \in [0, 1]$. При $s = 1$ произведение в (3.3) вообще не содержит множителей, поэтому по определению имеем $\tilde{\varphi}_1(t) = 1$. Формулы (3.8), (3.10) дают $a_{11} = \theta$, $b_1 = 1$. Из (3.7), (3.9) получаем

$$y_1 = y_0 + h\kappa_1, \quad (*)$$

$$\text{где } \kappa_1 = f(x_0 + \theta h, y_0 + h\theta\kappa_1). \quad (**)$$

Выразим из (*) $\kappa_1 = h^{-1}(y_1 - y_0)$, подставим (**) в (*) и получим в итоге

$$y_1 = y_0 + hf(x_0 + \theta h, y_0 + \theta(y_1 - y_0)). \quad (3.13)$$

Мы получили так называемый θ -метод. Эту формулу в 1824 году использовал Коши для оценки погрешностей решений дифференциальных уравнений. При $\theta = 0$ мы имеем явный, а при $\theta = 1$ — неявный метод Эйлера, при $\theta = 0.5$ — так называемое правило средней точки, или неявный метод средних прямоугольников.

▷3.3 Найдите общий вид коллокационных методов РК для $s = 2$.

3.2 Порядок коллокационного метода

Особенности конструкции коллокационных методов позволяют легко (в отличие от методов РК общего вида) исследовать их порядок для произвольного числа стадий s .

ТЕОРЕМА 1. *Рассмотрим многочлен $\omega(t) = \prod_{i=1}^s (t - c_i)$. Если ω ортогонален всем многочленам степени не выше $r - 1$, то есть*

$$\int_0^1 \omega(t) t^{q-1} dt, \quad \forall q = \overline{1, r},$$

то соответствующий коллокационный метод имеет порядок $s + r$.

СЛЕДСТВИЕ 1.1. *Порядок коллокационного метода с узлами $\{c_i\}$ равен $\sigma + 1$, где σ — алгебраическая степень точности интерполяционной квадратурной формулы с теми же узлами⁶.*

▷_{3.4} Какой наивысший возможный порядок может иметь одностадийный коллокационный метод (3.13)? При каком θ достигается этот порядок?

▷_{3.5} Чему равен наивысший порядок коллокационного метода в общем случае?

Кроме этого, существует равномерная оценка погрешности коллокационных методов и её производных.

ТЕОРЕМА 2. *Пусть y — точное решение системы ОДУ (1.1), u — коллокационный многочлен степени s . Тогда*

$$\|y^{(k)}(x) - u^{(k)}(x)\| \leq C h^{s+1-k}$$

и, в частности,

$$\|y(x) - u(x)\| \leq C h^{s+1}$$

для всех $x \in [x_0, x_0 + h]$. Здесь $\|\cdot\|$ — произвольная норма в \mathbb{R}^n , C — некоторая константа, не зависящая от h .

Доказательство теорем 1 и 2 можно найти в [1, сс. 222-224]

▷_{3.6} Постройте двухстадийный коллокационный метод наивысшего порядка.

⁶Напомним, что если σ — алгебраическая степень точности квадратурной формулы вида $\sum_k A_k f(x_k)$, то по определению $\sum_k A_k x_k^q = \int_a^b x^q dx \quad \forall q = \overline{0, \sigma}$, но $\sum_k A_k x_k^{\sigma+1} \neq \int_a^b x^{\sigma+1} dx$.

3.3 Классические коллокационные методы

Теорема 1 и её следствие указывают прямой путь построения коллокационных методов высокого порядка: необходимо в качестве $\{c_i\}$ выбрать узлы квадратурных формул с высокой АСТ, затем вычислить коэффициенты метода по формулам (3.8), (3.10). Получаемые таким образом методы являются в настоящее время наиболее популярными, и сейчас мы с ними познакомимся.

3.3.1 Гауссовы методы

Эти методы строятся на основе узлов квадратурных формул наивысшей алгебраической степени точности, или квадратурных формул Гаусса. Напомним, что узлы этих квадратурных формул являются корнями ортогональных (с единичным весом) на отрезке $[0, 1]$ многочленов — смещённых многочленов Лежандра

$$\frac{d^s}{dx^s} (x^s (x-1)^s). \quad (3.14)$$

Согласно теореме 1, порядок коллокационных методов Гаусса равен $2s$.

Приведём таблицу коэффициентов для трёхстадийного гауссова метода (порядок 6):

$$\begin{array}{c|ccc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} & \frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30} \\ \frac{1}{2} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24} & \frac{2}{9} & \frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24} \\ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30} & \frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} \\ \hline & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} \end{array} \quad (3.15)$$

3.3.2 Методы Радо

Если в качестве узлов коллокации выбрать корни так называемого правого многочлена Радо

$$\frac{d^{s-1}}{dx^{s-1}} (x^{s-1} (x-1)^s), \quad (3.16)$$

то получатся методы РК, называемые методами Радо ПА. За счёт фиксированного узла $c_s = 1$ АСТ соответствующей квадратурной формулы на

единицу меньше максимального и равен $2s - 1$. Несмотря на то, что порядок этих методов меньше, чем порядок гауссовых методов, именно они используются в наиболее известных программах решения жёстких задач RADAU5 [2] и RADAUP [3]. Коэффициенты трёхстадийного метода Радо ПА пятого порядка приведены ниже.

$$\begin{array}{c|ccc}
 \frac{4-\sqrt{6}}{10} & \frac{88-7\sqrt{6}}{360} & \frac{296-169\sqrt{6}}{1800} & \frac{-2+3\sqrt{6}}{255} \\
 \frac{4+\sqrt{6}}{10} & \frac{296+169\sqrt{6}}{1800} & \frac{88+7\sqrt{6}}{360} & \frac{-2-3\sqrt{6}}{255} \\
 1 & \frac{16-\sqrt{6}}{36} & \frac{16+\sqrt{6}}{36} & \frac{1}{9} \\
 \hline
 & \frac{16-\sqrt{6}}{36} & \frac{16+\sqrt{6}}{36} & \frac{1}{9}
 \end{array} \quad (3.17)$$

3.3.3 Методы Лобатто

Для этих методов узлы c_i являются корнями многочлена

$$\frac{d^{s-2}}{dx^{s-2}} (x^{s-1}(x-1)^{s-1}). \quad (3.18)$$

Построенные по этим узлам коллокационные методы называются методами Лобатто IIIA.

▷3.7 Постройте двухстадийные методы Радо ПА и Лобатто IIIA.

3.4 Особенности машинной реализации

Коллокационные методы, как мы уже успели заметить, занимают особое место среди неявных методов Рунге–Кутты. Помимо прочего их конструкция позволяет эффективно реализовать выбор начального приближения при решении систем нелинейных уравнений (2.19) (см. раздел 2.4.3).

Рассмотрим процесс пошагового численного интегрирования (1.13), где Φ — произвольный s -стадийный коллокационный метод. Пусть нами уже вычислено приближенное решение y_k в текущей точке x_k . Так как метод коллокационный, это автоматически означает, что нам известен многочлен u_k степени s , удовлетворяющий условиям коллокации в точках $x_{k-1} + c_i h$, $i = \overline{1, s}$, где $h = x_k - x_{k-1}$. Из (3.11) имеем

$$u_k(x) = y_{k-1} + h \sum_{i=1}^s \kappa_i \psi_i \left(\frac{x - x_0}{h} \right). \quad (3.19)$$

Здесь коэффициенты κ_i могут быть выражены через Y_i с помощью формулы (2.5). Многочлен u_k , очевидно, определён на всей числовой прямой, и если решение задачи Коши (1.1) меняется достаточно медленно, то u_k будет хорошим приближением к нему не только на отрезке $[x_{k-1}, x_k]$, но и при $x > x_k$.

Поэтому, с учётом замечания 3.1, выбор начального приближения

$$Z^0 = (z_1^0, \dots, z_s^0)^T = (Y_1^0 - y_k, \dots, Y_s^0 - y_k)^T$$

для ньютоновских итераций (2.21а) на следующем отрезке $[x_k, x_k + h_{new}]$ разумно сделать таким образом, чтобы соответствующее начальное приближение u_{k+1}^0 к искомому многочлену u_{k+1} совпадало с u_k в точках $x_k + c_i h_{new}$:

$$u_{k+1}^0(x_k + c_i h_{new}) = Y_i^0 = u_k(x_k + c_i h_{new}),$$

откуда

$$z_i^0 = y_{k-1} - y_k + h \sum_{j=1}^s \kappa_j \psi_j(1 + \delta c_i), \quad (3.20)$$

где $\delta = h_{new}/h$.

Приложение А. Лабораторные работы

А.1 Явные методы Рунге–Кутты

Цель работы: реализовать явный метод Рунге–Кутты для численного решения задачи Коши с автоматическим выбором шага интегрирования. Изучить экспериментально эффективность адаптивного выбора шага.

Постановка задачи. Для любой задачи из приложения Б.1 реализуйте метод Рунге–Кутты порядка $p > 2$ (см. раздел 2.3) с выбором шага а) по правилу Рунге или б) с помощью вложенного метода (метод Дормана–Принса (2.15)). Системы ОДУ второго порядка нужно предварительно привести к системам первого порядка путём введения новых зависимых переменных.

Проведите вычислительные эксперименты с разработанной программой, результаты экспериментов занесите в отчёт.

Требования к реализации

- Входные параметры: tol — требуемая точность, h_0 — величина начального шага, X — конечная точка интегрирования.
- Выходные данные: файл(ы) с точками (x_k, y_k) для построения графиков полученного численного решения, а также статистические данные о работе алгоритма, включающие
 - $N_{\text{всего}}$ — общее число шагов,
 - $N_{\text{принято}}$ — число принятых шагов,
 - $N_{\text{отброшено}}$ — число отброшенных шагов,
 - h_{min} — величина наименьшего шага,
 - h_{max} — величина наибольшего шага,
 - t — время работы вычислительного алгоритма.

Данные для отчёта

- графики компонент численного решения;
- фазовые графики численного решения;
- таблица, содержащая статистические данные о работе программы (см. выше) для как минимум трех различных значений параметра tol (например, 10^{-1} , 10^{-3} и 10^{-7}).

А.2 Введение в проблему жёсткости

Цель работы: познакомиться со свойствами жёстких задач на примере задачи Протеро—Робинсона. Изучить на практике проблемы, возникающие при решении жёсткой задачи явными методами.

Часть I

Рассмотрим задачу Протеро—Робинсона Б.2.1 (стр. 40). Зафиксируем отрезок интегрирования $I = [0, 2]$, в качестве g возьмём произвольную медленно изменяющуюся на I функцию.

Напишите программу, которая численно решает эту задачу явным и неявным методами Эйлера (стр. 5) с постоянным шагом h . Проведите экспериментальное сравнение этих методов, рассматривая отдельно случаи $\lambda \ll 0$, $\lambda \approx 0$, $\lambda > 0$. Для каждого из этих случаев и для различных значений h постройте графики численного и точного решений, а также графики погрешности.

Ответьте на следующие вопросы:

1. Каким нужно выбрать шаг h в зависимости от λ , чтобы при $\lambda \ll 0$ явный метод Эйлера адекватно отражал точное решение? Обоснуйте ответ теоретически и экспериментально (приведите соответствующие графики).
2. Почему неявный метод Эйлера при $\lambda \ll 0$ работает лучше явного?
3. Как работают оба метода при $\lambda \approx 0$? Почему?
4. Приведите пример, когда явный метод Эйлера работает лучше неявного и объясните это теоретически.

Часть II

Усовершенствуйте вашу программу из первой части работы: для обоих методов Эйлера реализуйте механизм автоматического выбора шага по правилу Рунге (стр. 10). Сравните эффективность реализованных вычислительных алгоритмов при следующих условиях:

1. Функция g медленно изменяется на I , $\lambda = -100$.
2. Функция g сильно осциллирует (например, $g(x) = m \cos ax \sin bx$, где $1 < |a| \ll |b|$, $m > 1$), $\lambda = -100$.

Объясните полученные результаты.

А.3 Неявные методы

Цель работы: реализовать коллокационный метод Рунге–Кутты для численного решения задачи Ван-дер-Поля. Показать преимущество неявного метода по сравнению с традиционными явными методами РК при решении жёсткой задачи.

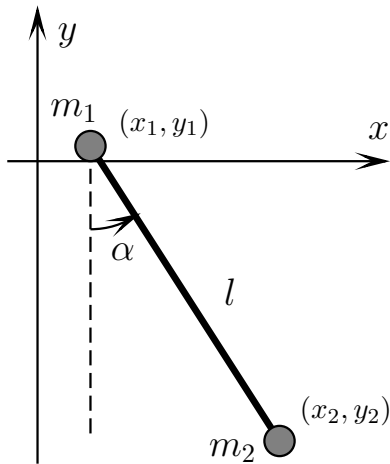
Ход работы

1. Для задачи Б.2.2 реализуйте коллокационный метод Рунге–Кутты порядка $p > 2$ (см. разделы 2.4.2, 3) с выбором шага по правилу Рунге. Требования к входным и выходным данным такие же, как для явных методов из лабораторной работы 1. При реализации вычислительного алгоритма следует руководствоваться указаниями из раздела 3.4.
2. Решите эту же задачу, используя явный метод Рунге–Кутты, реализованный в лабораторной работе 1.
3. Проведите сравнение эффективности явного и неявного методов для как минимум трёх различных значений параметра ε , например 1, 0.01 и 10^{-6} .
4. Статистические данные о работе обоих методов занесите в таблицу. Прокомментируйте полученные результаты.

Приложение Б. Тестовые задачи

Б.1 Нежёсткие задачи

Б.1.1 Маятник на свободной подвеске

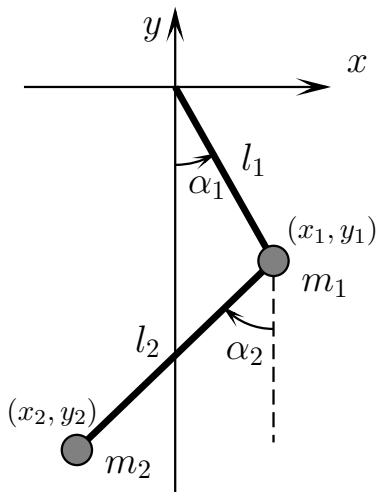


Рассмотрим систему из двух точечных масс m_1 и m_2 , соединённых невесомым жёстким стержнем длины l . Точка с массой m_1 не закреплена и может перемещаться (без трения) вдоль оси x . Движение считается плоским. Дифференциальное уравнение для обобщённых координат (x_1, α) имеет вид

$$\begin{cases} (m_1 + m_2)\ddot{x}_1 + m_2l\ddot{\alpha} \cos \alpha = m_2l\dot{\alpha}^2 \sin \alpha, \\ \ddot{x}_1 \cos \alpha + l\ddot{\alpha} = -g \sin \alpha. \end{cases}$$

Подробный вывод данного уравнения можно найти в [5, стр. 105].

Б.1.2 Двойной маятник



Рассмотрим двойной маятник, состоящий из двух невесомых жёстких стержней длин l_1 и l_2 и точечных масс m_1 и m_2 , как изображено на рисунке. Движение системы полностью описывается двумя функциями, определяющими изменение во времени углов α_1 и α_2 . Эти функции удовлетворяют следующей системе ОДУ второго порядка.

$$\begin{cases} \ddot{\alpha}_1 = \frac{-g(2m_1 + m_2) \sin \alpha_1 - m_2g \sin(\alpha_1 - 2\alpha_2) - 2m_2(l_1\dot{\alpha}_1^2 \cos \alpha_1 + l_2\dot{\alpha}_2^2) \sin \alpha_1}{l_1(2m_1 + m_2 - m_2 \cos 2\alpha_2)}, \\ \ddot{\alpha}_2 = \frac{2 \sin \alpha_1 (l_1 m_1 \dot{\alpha}_1^2 + g m_1 \cos \alpha_1 + l_2 m_2 \dot{\alpha}_2^2 \cos \alpha_1)}{l_2(2m_1 + m_2 - m_2 \cos 2\alpha_2)}. \end{cases}$$

Здесь g — гравитационная постоянная, и использованы также следующие сокращения:

$$m = m_1 + m_2, \quad \alpha = \alpha_1 - \alpha_2.$$

Б.1.3 Орбита Аренсторфа

Рассмотрим плоское движение тела пренебрежимо малой массы (спутника) в поле тяготения, создаваемом двумя телами, находящимися в точках $(0, 0)$ (Земля) и $(1, 0)$ (Луна). Координаты тела в момент времени t задаются векторной функцией $x = (x_1, x_2)^T$, которая удовлетворяет следующей системе ОДУ второго порядка:

$$\begin{cases} \ddot{x}_1 = x_1 + 2\dot{x}_2 - \mu' \frac{x_1 + \mu}{D_1} - \mu \frac{x_1 - \mu'}{D_2}, \\ \ddot{x}_2 = x_2 - 2\dot{x}_1 - \mu' \frac{x_2}{D_1} - \mu \frac{x_2}{D_2}, \end{cases}$$

где

$$D_1 = ((x_1 + \mu)^2 + x_2^2)^{3/2}, \quad D_2 = ((x_1 - \mu')^2 + x_2^2)^{3/2},$$

$$\mu = 0.012277471, \quad \mu' = 1 - \mu.$$

Начальные условия, определяющие периодическую траекторию (орбиту Аренсторфа), имеют вид

$$x(0) = (0.994, 0)^T,$$

$$\dot{x}(0) = (0, -2.00158510637908252240537862224)^T,$$

$$t_{\max} = 17.0652165601579625588917206249.$$

Б.1.4 Внешняя Солнечная система

Рассмотрим механическую систему, состоящую из Солнца и пяти планет внешней солнечной системы (Юпитер, Сатурн, Уран, Нептун, и Плутон⁷). Ввиду того, что планеты земной группы (Меркурий, Венера, Земля, Марс) вместе с поясом астероидов имеют сравнительно малую массу, будем рассматривать их как часть Солнца.

⁷В настоящее время Плутон, как известно, планетой уже не считается.

Запишем уравнения, описывающие движение указанных шести небесных тел. Вектор координат каждого тела обозначим $q_i = (q_{i1}, q_{i2}, q_{i3})^T$, соответствующий вектор импульса — $p_i = (p_{i1}, p_{i2}, p_{i3})^T$, $i = \overline{0, 5}$. По определению имеем $p_i = m_i \dot{q}_i$, где m_i — масса i -го тела. Из векторов p_i , q_i составим большие векторы $p = (p_0, \dots, p_5)$, $q = (q_0, \dots, q_5)$. Функция Гамильтона для рассматриваемой системы имеет вид

$$H(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^5 \frac{1}{m_i} p_i^T p_i - G \sum_{i=1}^5 \sum_{j=0}^{i-1} \frac{m_i m_j}{\|q_i - q_j\|},$$

а дифференциальные уравнения, связывающие p и q , имеют вид

$$\dot{p}_{ij} = -\frac{\partial H}{\partial q_{ij}}(p, q), \quad \dot{q}_{ij} = \frac{\partial H}{\partial p_{ij}}(p, q), \quad i = \overline{0, 5}, \quad j = \overline{1, 3}.$$

Здесь $\|\cdot\|$ — евклидова норма вектора. Таким образом, мы имеем систему из 36 обыкновенных дифференциальных уравнений. Приведённые в таблице начальные условия соответствуют состоянию Солнечной системы на 0 часов 00 минут 5 сентября 1994 года.

i	Тело	m_i	$q_i(0)$	$\dot{q}_i(0)$
0	Солнце	1.00000597682	$(0, 0, 0)^T$	$(0, 0, 0)^T$
1	Юпитер	0.000954786104043	-3.5023653 -3.8169847 -1.5507963	0.00565429 -0.00412490 -0.00190589
2	Сатурн	0.000285583733151	9.0755314 -3.0458353 -1.6483708	0.00168318 0.00483525 0.00192462
3	Уран	0.0000437273164546	8.3101420 -16.2901086 -7.2521278	0.00354178 0.00137102 0.00055029
4	Нептун	0.0000517759138449	11.4707666 -25.7294829 -10.8169456	0.00288930 0.00114527 0.00039677
5	Плутон	$1/(1.3 \cdot 10^8)$	-15.5387357 -25.2225594 -3.1902382	0.00276725 -0.00170702 -0.00136504

Единица массы равна массе Солнца ($m_0 > 1$ с учётом массы планет земной группы и пояса астероидов), гравитационная постоянная равна

$$G = 2.95912208286 \cdot 10^{-4}.$$

Время измеряется в днях, расстояния — в астрономических единицах (1 а. е. ≈ 149597870 км).

Б.1.5 Аттрактор Лоренца

Данная система ОДУ появилась в результате попыток математического моделирования климата. При определённом выборе параметров траектория любого решения этой системы стремится при $t \rightarrow \infty$ к асимптотически устойчивому непериодическому решению — так называемому «странному аттрактору» (подробнее см. [1, сс. 125–129]).

$$\begin{cases} y_1' = -\sigma(y_1 - y_2), \\ y_2' = -y_1y_3 + ry_1 - y_2, \\ y_3' = y_1y_2 - by_3, \end{cases} \quad y(0) = (-8, 8, r - 1)^T.$$

Упомянутое хаотичное поведение решения достигается, например, при следующих значениях параметров: $\sigma = 10$, $b = 8/3$, $r = 28$.

Б.1.6 Улучшенная модель «хищник–жертва»

Пусть $H(t)$ — численность популяции жертв, $P(t)$ — численность популяции хищников. Динамика численности этих двух популяций описывается следующей системой ОДУ:

$$\begin{cases} H'(t) = r_H \left(1 - \frac{H(t)}{H_{\max}}\right) H(t) - \frac{aH(t)}{1 + aT_0H(t)} P(t), \\ P'(t) = r_P \left(1 - \frac{P(t)}{kH(t)}\right) P(t). \end{cases}$$

Здесь

r_H, r_P — коэффициенты роста популяций жертв и хищников соответственно,

H_{\max} — критическое значение численности жертв,

a — эффективность поиска жертвы,

T_0 — время «обработки» одним хищником одной жертвы,

k — коэффициент зависимости критической численности хищников от численности жертв.

В зависимости от выбора коэффициента a система демонстрирует качественно различное поведение. Зафиксируем $r_P = 0.1$, $r_H = 0.2$, $T_0 = 0.5$, $k = 0.2$, $H_{\max} = 500$. Тогда при $a = 0.001$ система выходит

на стационарное положение равновесия без осцилляций; при $a = 0.1$ появляются затухающие осцилляции; при $a = 0.3$ наблюдается предельный цикл.

Б.2 Жёсткие задачи

Наиболее простой (и наименее информативной) характеристикой жёстких начальных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений является то, что к этим задачам практически неприменимы традиционные явные методы. Поэтому для численного решения нижеследующих задач следует использовать неявные (в частности, коллокационные) методы.

Б.2.1 Задача Протеро–Робинсона

Рассмотрим произвольную функцию $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ и число $\lambda \in \mathbb{R}$. Задача Коши

$$y'(x) = \lambda(y(x) - g(x)) + g'(x), \quad y(0) = y_0,$$

называется *задачей Протеро–Робинсона*. Её решение, как легко видеть, определяется формулой

$$y(x) = g(x) + e^{\lambda x}(y_0 - g(0)).$$

Если $\lambda \ll 0$, а функция g медленно изменяется, получаем простейший пример жёсткой задачи (см. [4, стр. 16]).

Б.2.2 Осциллятор Ван-дер-Поля

Задача Коши, описывающая осциллятор Ван-дер-Поля, имеет вид

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = ((1 - y_1^2)y_2 - y_1) / \varepsilon, \end{cases} \quad y(0) = (2, 0)^T, \quad \varepsilon = 10^{-1}, 10^{-2}, \dots, 10^{-20}.$$

Данная задача является традиционным тестом для методов решения жёстких ОДУ. При $\varepsilon \rightarrow 0$ трудность численного решения задачи возрастает. В качестве конечной точки интегрирования берут $X = 1, 2, \dots, 11$.

Б.2.3 Реакция Робертсона

Химическая реакция Робертсона описывается начальной задачей

$$\begin{cases} y_1' = -0.04y_1 + 10^4 y_2 y_3, \\ y_2' = 0.04y_1 - 10^4 y_2 y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2, \\ y_3' = 3 \cdot 10^7 y_2^2 \end{cases}, \quad y(0) = (1, 0, 0)^T.$$

Длину отрезка интегрирования выбирают равной $1, 10, \dots, 10^{11}$.

Б.2.4 Реакция Белоусова–Жаботинского

Следующая начальная задача описывает математическую модель известной периодической химической реакции Белоусова–Жаботинского.

$$\begin{cases} y_1' = 77.27 (y_2 + y_1(1 - 8.375 \cdot 10^{-6} y_1 - y_2)), \\ y_2' = \frac{1}{77.27} (y_3 - (1 + y_1)y_2), \\ y_3' = 0.161(y_1 - y_3), \end{cases} \quad y(0) = (1, 2, 3)^T.$$

Отрезок интегрирования определяется конечной точкой $X = 30, 60, 90, \dots, 360$.

Список литературы

- [1] Хайрер, Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Пер. с англ. — М.: Мир, 1990. — 512 с.
- [2] Хайрер, Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи / Хайрер Э., Ваннер Г. Пер. с англ. — М.: Мир, 1999. — 685 с.
- [3] E. Hairer, G. Wanner, “Stiff differential equations solved by Radau methods”, in *J. Comp. and Appl. Math.* 111, 1999, pp. 93-111.
- [4] Деккер, К. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений / Деккер К., Вервер Я. Пер. с англ. — М.: Мир, 1988. — 334 с.
- [5] Самарский, А. А. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. / Самарский А. А., Михайлов А. П. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. — 320 с.

Учебное издание

Фалейчик Борис Викторович

**ОДНОШАГОВЫЕ МЕТОДЫ
ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ**

Учебно-методическое пособие

В авторской редакции

Ответственный за выпуск *Б. В. Фалейчик*

Подписано в печать 04.05.2010. Формат 60 × 84/16. Бумага офсетная.
Гарнитура Roman. Усл. печ. л. 2,56. Уч.-изд. л. 2,28. Тираж 50 экз. Зак.

Белорусский государственный университет.
ЛИ №02330/0494425 от 08.04.2009.
Пр.Независимости, 4, 220030, Минск.

Отпечатано с оригинала-макета заказчика на копировально-множительной технике
факультета прикладной математики и информатики
Белорусского государственного университета.
Пр.Независимости, 4, 220030, Минск.